Fluctuation Theoremの量子補正

早稲田大学 理工学部　門内　隆明,　田崎 秀一 [1]

非平衡系でも厳密に成立する定理としてFluctuation Theorem(FT)が知られている。FTはエントロピー生成のゆらぎに対称性があることを主張する定理で熱力学第二法則の拡張でもある。FTの具体的内容は古典系で次式が成立するという主張である。:

$$\left(\lim_{\tau\to+\infty}\right)\frac{1}{\tau}\log\frac{\mathrm{Prob}(\sigma)}{\mathrm{Prob}(-\sigma)}=\sigma \tag{1}$$

ここでProb(σ)は時間τの間の平均エントロピー生成率σの観測値の確率分布で、極限$\tau\to+\infty$は系によってとったりとらなかったりする。古典系においてFTは普遍的でstochasticな系[2]、deterministicな系[3]両方で成立する。本研究では厳密に解ける模型（調和振動子の系が熱浴（調和振動子の集まり）と線形に相互作用するモデル）を量子力学的に扱い、エントロピー生成に対応する演算子を導入し、その観測値の分布関数について古典FTの表式(1)が成立するかどうかを調べた。結果として(1)は量子補正を受けることが分かった。

1　MODEL

次のHamiltonian[4][5]で与えられる系を考える。

$$H(t) = H_0+\frac{k}{2}f(t)\left(-2q+f(t)\right)\ , \tag{2}$$

$$H_0 = \frac{p^2}{2m}+\frac{k}{2}q^2+\frac{1}{2}:\int d\lambda((p_\lambda-\kappa_\lambda q)^2+\omega_\lambda^2 q_\lambda^2):\ , \tag{3}$$

ここで、q, p, m, kは調和振動子の位置、運動量、質量、バネ定数でq_λ, p_λ,ω_λは熱浴変数である。$f(t)$は時刻tでのポテンシャルの中心の位置で$f(0)=0$とする。また、$t\le 0$で全系は熱平衡にあるとする。

2　エントロピー生成演算子と分布関数

エントロピー生成に対応する演算子を

$$\hat{\Sigma}_\tau\equiv\beta\int_0^\tau\frac{\partial H(s+t)}{\partial t}ds=\beta\int_0^\tau\dot{f}(s)(-k(q(s)-f(s)))ds \tag{4}$$

と定義する。$\hat{\Sigma}_\tau$の観測値の確率密度分布関数は

$$\pi(\Sigma_\tau=A)=\left\langle e^{-\beta H_0}\delta(\hat{\Sigma}_\tau-A)\right\rangle \tag{5}$$

で与えられる。ここで$\langle\cdots\rangle\equiv\mathrm{tr}(e^{-\beta H_0}\cdots)/Z$とした。($Z$は分配関数)

[1] E-mail: monnai@suou.waseda.jp

3　分布関数の計算とFTの量子補正

$\pi(\Sigma_\tau = A)$ はGauss分布であることが示される。

$$\eta_+(z) \equiv mz^2 - k - \int d\lambda \kappa_\lambda^2 - \int d\lambda \frac{\omega_\lambda v_\lambda^2}{z^2 - \omega_\lambda^2 + i0} \tag{6}$$

$v_\lambda \equiv \sqrt{\omega_\lambda}\kappa_\lambda$ として平均 m_τ, 分散 σ_τ^2 は次のようになる。

$$m_\tau = \beta k^2 \int_0^\tau ds \int_0^s ds' \int d\lambda \frac{v_\lambda^2}{|\,\eta_+(\omega_\lambda)\,|^2} \frac{\cos(\omega_\lambda(s-s'))}{\omega_\lambda} \dot{f}(s)\dot{f}(s') \tag{7}$$

$$\sigma_\tau^2 = \frac{\hbar k^2 \beta^2}{2} \int_0^\tau ds \int_0^\tau ds' \int d\lambda \frac{v_\lambda^2 \cos(\omega_\lambda(s-s'))}{|\,\eta_+(\omega_\lambda)\,|^2} \coth(\frac{\beta\hbar\omega_\lambda}{2}) \dot{f}(s)\dot{f}(s') \tag{8}$$

よって

$$\log \frac{\pi(\Sigma_\tau = A)}{\pi(\Sigma_\tau = -A)} = \frac{2m_\tau}{\sigma_\tau^2} A\ . \tag{9}$$

となり A の係数 $\frac{2m_\tau}{\sigma_\tau^2}$ の1からのずれがFTの補正ということになり次のように書ける：

$$\log \frac{\pi(\Sigma_\tau = A)}{\pi(\Sigma_\tau = -A)} = \left(1 + \hbar^2 \epsilon_2 + \mathrm{O}(\hbar^4)\right) A\ . \tag{10}$$

具体的に $f(t) = v_0 t$, $\mu \equiv \int \kappa_\lambda^2 d\lambda / k \ll 1$ として ϵ_2 を評価すると $\epsilon_2 = -\frac{\beta^2 k}{24m}(1 + \mathrm{O}(\mu))$ となる。従ってFTの量子補正は一般に $\hbar^2$ のオーダーで、低温では顕著になる。また補正は熱浴の形によらない結果になっている。

4　謝辞

本研究は、科研費基盤研究(C)(日本学術振興会)、同特定領域研究「強レーザー光子場における分子制御」および早稲田大学21世紀COEプログラム「多元要素からなる自己組織系の物理」から支援をうけています。

参考文献

[1] T.Monnai, S.Tasaki, e-print cond-mat/0308337

[2] J. Kurchan, J. Phys. A 31 (1998) 3719.

[3] C. Jarzynski J. Stat. Phys. 98 (2000) 77.

[4] C.W.Gardiner, Quantum Noise, (Springer Verlag, Berlin, 1991) Chap.3.

[5] E. Karpov, I. Prigogine, T. Petrosky and G. Pronko J. Math. Phys. 41 (2000) 118.